

PORTAL DO DOCENTE > RELATÓRIO FINAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA**RELATÓRIO FINAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA****Discente:** 201912145 - ROBERTA CRISTINA LIMA DOS SANTOS**Plano:** **Uso do método DFT no estudo vibracional de grupos carboxílicos de óleo de castanha-do-Brasil****Orientador:** QUESLE DA SILVA MARTINS**Data de Envio:** 12/08/2023 14:56**Tipo de Pesquisa:** Pesquisa Científica**Progresso da Pesquisa:** Em andamento**OBJETIVOS DE DESENVOLVIMENTO SUSTENTÁVEL DA AGENDA 2030 DA ONU**

- Assegurar a educação inclusiva e equitativa e de qualidade, e promover oportunidades de aprendizagem ao longo da vida para todos.

RESUMO**Resumo:**

Este relatório final apresenta a pesquisa sobre espectroscopia Raman e infravermelho e cálculos DFT (Teoria Funcional da Densidade) ab initio, trazendo os estudos realizados em óleos vegetais na região amazônica, mais especificamente sobre o óleo da castanha-do-Brasil. Apresento também os objetivos gerais e específicos da pesquisa, como a metodologia, cronograma e as atividades elaboradas pela bolsista como: a preparação de trabalhos que foram apresentados em eventos, submissão de trabalhos para publicação em revistas eletrônicas. Também houve participações de professores convidados, para apresentações que trouxeram grande conhecimento em suas áreas de pesquisas.

Palavras-chave:

Óleo da castanha-do-Brasil, Espectroscopia Raman, DFT.

ABSTRACT**Title:**

USE OF THE DFT METHOD FOR THE VIBRATIONAL STUDY OF CARBOXYL GROUPS OF OIL OF BRAZIL NUTS

Abstract:

This final report presents research on Raman and infrared spectroscopy and DFT (Functional Density Theory) calculations ab initio, bringing studies carried out on vegetable oils in the Amazon region, more specifically on Brazil nut oil. I also present the general and specific objectives of the research, such as the methodology, schedule and activities carried out by the scholarship holder, such as: preparing papers that were presented at events, submitting papers for publication in electronic journals. There were also participations by guest professors, for presentations that brought great knowledge in their research areas.

Keywords:

Brazil nut oil, Raman spectroscopy, DFT.

CORPO DO RELATÓRIO**Introdução**

A castanheira-do-Brasil (*Bertholletia excelsa*), é uma árvore de origem Amazônica que é um símbolo da Amazônia. O fruto é um ouriço, contendo em seu interior, em média, 12 a 24 castanhas ou sementes, as quais envolvem as amêndoas, parte comestível do fruto. A castanha-do-Brasil tem cerca de 60% de fração lipídica é uma matriz complexa, com substâncias bioativas, como selênio, α e γ -tocoferóis, composto fenólicos, folato, cálcio, magnésio, fósforo, zinco, vitaminas do complexo B, vitamina E, proteínas, ácidos graxos (AG) monoinsaturados (possui uma única dupla ligação) e ácidos graxos poli-insaturados (contêm duas ou mais ligações duplas). O Óleo da castanha-do-Brasil é obtido por processo de prensagem a frio de onde se obtém um óleo fino e de altíssima qualidade. Sua cor é o amarelo, com odor e sabor característicos. Os ácidos graxos possuem estruturas carbônicas ligadas a um grupo carboxila. O estudo por espectroscopia Raman é feito por um laser na cor visível, onde uma radiação monocromática incide na amostra, havendo um espalhamento de luz. Com esta técnica é possível conhecer a característica do padrão espectral que é definido devido a composição do material, formando uma espécie de assinatura ou impressão digital. A espectroscopia na região do Infravermelho (IR) é uma técnica de espectroscopia vibracional baseada em absorção molecular em que a energia, quando absorvida por uma determinada molécula, promove transições vibracionais e rotacionais. O método DFT é ab initio, utilizado para execução de cálculos computacionais de primeiros princípios. Este cálculo serve para obter o espectro teórico vibracional, energia de conformação, polarizabilidade, frequências teóricas ou calculadas, otimização, forma da estrutura molecular, modos vibracionais, momento dipolo, entre outros. E são utilizadas moléculas presentes na amostra para realização desses cálculos. O estudo do óleo da castanha-do-Brasil, através da espectroscopia Raman e Infravermelho, foi possível graças a uma amostra cedida pela empresa Inovam Brasil. Este estudo foi feito, justamente para valorizar os produtos da região Amazônica, realizando a caracterização dos produtos naturais da nossa região.

Metodologia

O projeto é executado em regime de trabalho de 20 (vinte) horas semanais, em encontros semanais/mensais em turno contrário do horário de aula. O bolsista é orientado pelo orientador, a desenvolver as atividades propostas. As atividades iniciais foram estudos direcionados a espectroscopia vibracional, estudos direcionados a Física aplicada a cálculo ab initio, tanto como verificação de escrita através de relatórios de atividades e apresentação de seminários, assim como desenvolver o cronograma proposto. Sobre orientação do orientador o bolsista desenvolveu habilidades com os seguintes softwares: Gaussian 9, Gaussview 6, e o Veda.

Resultados e Discussões

Foi demonstrado pelo orientador, sobre como realizar o processo de análise da molécula pertencente à amostra do óleo da castanha-do-Brasil, com os cálculos DFT ab initio, via Software Gaussian 09 e Gaussview 06, que foram utilizados os parâmetros como: otimização + frequência, calcular para Raman, funcional de densidade B3LYP. Foram propostos a serem usados 3 conjuntos de base diferentes, 6-31G (d, p), cc-pVDZ, LANL2DZ, para as moléculas, ácido oleico (Ver na Figura 01) e ácido esteárico. Para a molécula do ácido esteárico foram calculados todos os conjuntos de bases propostos, porém para a molécula do ácido oleico, não foi possível realizar o cálculo do conjunto de base LANL2DZ, pois ocorreu um erro não esclarecido. Veja na Tabela 2 e 3, alguns resultados encontrados, obtidos pelo cálculo DFT, para a molécula do ácido esteárico e molécula do ácido oleico. Também foi utilizado o Software VEDA, para encontrarmos o EPM (Parâmetro máximo de energia), o percentual de contribuição e os modos vibracionais, como, de estiramento, deformação, torção e outros. Resultados encontrados no cálculo DFT, para molécula do ácido esteárico: Conjunto de Base 6-31 G (d, p), Energia de Conformação -858.156880 Hartree, Momento Dipolo 1.389085, Polarizabilidade 205.425333, tempo de cálculo 1 dia, 1 h e 16 min. Conjunto de Base CC- pVDZ, Energia de Conformação -858.134274 Hartree, Momento Dipolo 1.350877, Polarizabilidade 216.011000, Tempo de Cálculo 1 dia, 16 h e 56 min. Conjunto de Base LANL2DZ, Energia de Conformação -857.962691 Hartree, Momento Dipolo 1.597090, Polarizabilidade 197.797667, tempo de cálculo 5 h e 37 min. Resultados encontrados no cálculo DFT, para a molécula do ácido oleico: Conjunto de Base 6-31 G (d, p),

Energia de conformação -856.919156 Hartree, Momento Dipolo 1.466218, Polarizabilidade 200.82100, tempo de cálculo 1 dia, 14 h e 27 min. Conjunto de Base CC-pVDZ, Energia de conformação -856.902131 Hartree, Momento Dipolo 1.463994, Polarizabilidade 211.048667, tempo de cálculo 2 dias, 10 h e 18 min. O Conjunto de Base LANL2DZ para o ácido oleico, o cálculo deu um erro, não sendo possível trazer os resultados do mesmo.

Dentre as etapas estudadas outros grupos moleculares foram submetidos à mesma rotina e alguns deles pode ser vistos no artigo intitulado: DFT method in ALA, DHA and EPA molecules in Raman vibrational analysis of ostrich oil from the Amazon publicado na revista Scientia Amazonia. Dentre outras tarefas junto ao grupo de pesquisa, teve-se o aceite para publicação em Revista Mexicana de Física, o artigo Raman and FTIR spectroscopy experimental and theoretical in magnetic nanoemulsion from Carapa Guianensis Aublet. A principal etapa desenvolvida reúne informações e conhecimento teórico computacional a fim de discutir conceitos da físico-química experimental aplicada, especialmente no que trata das etapas de caracterização de materiais através da espectroscopia vibracional.

Conclusões

Sendo assim concluímos que, o uso do método DFT do estudo vibracional de grupos carboxílicos de óleo de castanha-do-Brasil, chegaram a resultados satisfatórios. Resultados esses que foram encontrados utilizando as moléculas do ácido esteárico e do ácido oleico presentes no óleo da castanha-do-Brasil, através dos cálculos DFT ab initio, via Software Gaussian 09, e o Gaussview 06, que foram utilizados os parâmetros como: otimização + frequência, calcular para Raman, funcional de densidade B3LYP, e os conjuntos de bases 6-31 G (d, p), CC- pVDZ, e LANL2DZ, tendo como resultado a energia de conformação, momento dipolo, polarizabilidade, tempo de cálculo, o espectro teórico Raman, podendo assim comparar com o espectro experimental Raman. Com essa técnica foi possível conhecer a característica do padrão espectral que é definido devido a composição do material, formando uma espécie de assinatura ou impressão digital. Também foi utilizado o Software VEDA, para encontrarmos o EPM, o percentual de contribuição e os modos vibracionais, como, de estiramento, deformação, torção e outros.

Este estudo do óleo da castanha-do-Brasil, foi feito para dar valor para os produtos da região amazônica, assim como há muitos produtos dessa região que ainda poderão ser objetos de pesquisa, sendo possível novos estudos a serem feitos.

Referências

- [1] O. Sala, Fundamentos da espectroscopia Raman e no Infravermelho. 2a ed. São Paulo: Livraria da Física (2004)
- [2] P. Larkin (Peter J.), Infrared and Raman spectroscopy: principles and spectral interpretation. Elsevier Inc. (2011)
- [3] V.C. Raman, K.S. Krishnan, Nature, 501, (1928)
- [4] J.L.B. Faria, Tese de Doutorado, UFC - Ceará (2003)
- [5] Q.S. Martins, Tese de doutorado, UFMT – Cuiabá (2020)
- [6] Q.S. Martins, L.M.S. Santos, J.L.B. Faria. Raman spectra and ab-initio calculations in Bertholletia excelsa oil, Vib. Spectrosc. v. 106, p. 102986, (2020).
- [7] FUNASAKI, M.; et. al., Quim. Nova, 39 (2), 194-209, (2016)
- [8] RADÜNZ, L. L., Tese de Doutorado, UFV - Minas Gerais (2004)
- [9] Q.S. Martins, C.A. Aguirre, J.L.B. Faria, Approach by Raman and infrared spectroscopy in three vegetable oils from the Brazilian Amazon, Rev. Mex. Phys. n. 65, p. 328-332 (2019).
- [10] FAZZIO, A.; VIANNA, J. D. M.; CANUTO, S. Teoria quântica de moléculas e sólidos: simulação computacional. Livraria da Física, SP, (2004).
- [11] MAGALHÃES, Alissa. Alimentos Ricos em lipídios, Educa mais Brasil. <https://www.educamaisbrasil.com.br/enem/biologia/alimentos-ricos-em-lipidios>. Acesso em 18 de maio de 2023.
- [12] PAULO, Ribeiro Claro. Claro, P.R., (2018) Espectroscopia Vibracional, Rev. Ciência Elem., V6(2):040 <http://doi.org/10.24927/rce.2018.040>.
- [13] Adrielle R. Santosa; Denise B. Menezes; Javier Ellena; Marcelo B. Andrade. Aplicação da espectroscopia Raman na caracterização de minerais pertencentes a uma geocoleção. Publicado em maio de 2019. <https://doi.org/10.21577/0100-4042.20170358>.

PARECER (EMITIDO EM 13/08/2023 08:33)

Apresenta grande interesse por atividades propostas e boa disponibilidade para aprofundar nas questões abordadas. Bom relacionamento em grupo e conclui nos prazos atividades sugeridas e/ou do cronograma inicial.

[<< Voltar](#)

[Portal do Docente](#)